

English Summary:

2.2 Fokker-Planck eq.

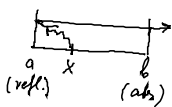
$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} J_i(x,t) = 0 \quad \text{local balance eq.}$$

with probability flux $J_i(x,t) = A_i(x,t)P(x,t) - \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} (B_{ij}(x,t)P(x,t))$
drift diffusion

Stationary sol. for hom. Markov process: $J(x) = \text{const} = J(a) = J(b)$
 reflecting boundary cond. $J(a) = 0$

$$P^*(x) = \frac{N}{B(x)} \exp \left[2 \int_a^x dx' \frac{A(x')}{B(x')} \right] \quad \text{potential sol.}$$

First passage time $T(x) := \langle T \rangle = \int_0^\infty dt G(x,t)$

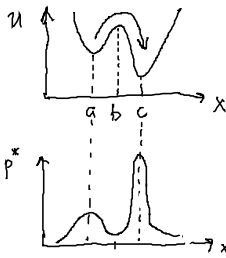


$$G(x,t) := \int_a^b dx' p(x',t|x,0) \equiv \text{Prob.}(T \geq t)$$

$$T(x) = 2 \int_x^b \frac{dy}{\Psi(y)} \int_a^y dz \frac{\Psi(z)}{B(z)}$$

$$\Psi(x) = \exp \left[2 \int_a^x dx' \frac{A(x')}{B(x')} \right]$$

Kramers' Problem: Entweichung über Potenzialbarriere
 überdämpftes Teilchen im bistabilen Pot. U



$$\dot{x} = -U'(x) \equiv A(x)$$

Kraft

Diff. konst $D = \frac{B}{2}$

FP-gl.

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = \frac{\partial}{\partial x} [U'(x)P(x,t)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t)$$

stat. Lös. $p^*(x) = N \exp \left[- \int_a^x dx' \frac{U'(x')}{D} \right] = \tilde{N} \exp \left[- \frac{U(x)}{D} \right]$
(refl Randbed.) Potenziallösung

bimodale Wahrscheinlichkeitsverb.

Mittlere Erweichzeit $a \rightarrow c$

mean first passage time $a \rightarrow b$ (Rand des Attraktionsbeckens von a)

$$T(x) = 2 \int_x^b \frac{dy}{\Psi(y)} \int_a^y dz \frac{\Psi(z)}{B(z)} \quad \text{Intervall } (a, b)$$

$a \rightarrow -\infty$ (refl. Rand)

$b \rightarrow x_0 \times b$ (absorb. Rand)

$x \rightarrow a$ (Auf. bed.)

$$\Psi(x) = e^{-\frac{U(x)}{D}}$$

$$\Rightarrow T(a \rightarrow x_0) = \frac{1}{D} \int_a^{x_0} dy e^{\frac{U(y)}{D}} \int_a^y dz e^{-\frac{U(z)}{D}}$$

scharf gepiket bei $y=b$ klein bei $z=b \Rightarrow$ \int_a^b setzt $y \approx b$

scharf gepiket bei $z=a$ scharf gepiket bei $z=a$

$$T(a \rightarrow x_0) \approx \frac{1}{D} \int_a^{x_0} dy \exp \left[\frac{U(y)}{D} - \frac{(y-b)^2}{2D\delta^2} \right] \int_a^y dz \exp \left[-\frac{U(z)}{D} - \frac{(z-a)^2}{2D\delta^2} \right]$$

$$\approx \frac{1}{D} \delta \sqrt{2\pi D} \exp \left[\frac{U(b)}{D} \right] \delta \sqrt{2\pi D} \exp \left[-\frac{U(a)}{D} \right]$$

1) Konzent. v. $U(x)$ um $b / \text{um } a$)

$$T(a \rightarrow b) \approx 2\pi \alpha \delta^2 \exp\left[-\frac{U(b) - U(a)}{\delta}\right]$$

$$v_k = \frac{1}{T} \quad \text{Kramers-Rate}$$

- $U(b) - U(a) \equiv$ Potenzialbarriere
- Arrhenius-Formel der chem. Reaktionstheorie
- statist. Mechanik im Gleichgewicht: $D = kT$

2.3 Langevin-Gleichung

Alternativer Zugang:

statt Dgl. für Wahrscheinlich. verteilung $p(x, t)$

jetzt Dgl. für Zufallsvar. $x(t)$ mit fluktuierender Kraft $\xi(t)$
(Zufallskraft)

$$\frac{dx}{dt} = a(x, t) + b(x, t) \xi(t) \quad \text{stochast. Dgl.}$$

additives Rauschen: $b(x, t) = \text{const}$

multipikat. Rauschen: $b(x, t) \propto x$ -abh.

Beispiel: Brownsche Bewegung (Robert Brown 1827)

zu fällige Bewegung von Pollen im Wasser
(durch Stöße mit Wassermolekülen)

Theorie durch Einstein 1905 (Chapman-Kolmogorov-Gl.)

Langevin (1906): $m \ddot{x} = \underbrace{-\eta \dot{x}}_{\text{Reibung}} + \underbrace{\xi(t)}_{\text{Rauschen}}$

mit $\dot{x} = v$: $\dot{v} = -\alpha v + \xi(t)$

Gauß'sches weißes Rauschen

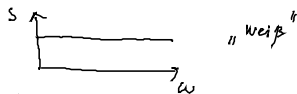
$$\langle \xi(t) \rangle = 0$$

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \delta(t - t') \quad \text{unkorrel. Zufallskraft}$$

höhere Momente verschwinden \Rightarrow Gaußverteilung

Spektrale Leistungsdichte (Wiener-Khinchin-Theorem):

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \xi(t) \xi(t+s) \rangle e^{-i\omega s} ds = \frac{1}{2\pi} = \text{const}$$



Mathem. Problematik: $\xi(t)$ ist unstetig, nicht integrierbar

Kalkül der stoch. Dgl und stoch. Integration (Itô, Stratonovich)

$$dx = a(x, t) dt + b(x, t) dW(t) \quad \text{mit } \xi(t) = \frac{dW}{dt}$$

$W(t)$ stoch. Prozess

$$\Leftrightarrow X(t) - X(0) = \int_0^t dt' a(x, t') + \int_0^t dW(t') b(x, t') \quad (I_{t_0})$$

Zusammenhang mit Fokker-Planck-Gl.:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t | x_0, t_0) = -\frac{\partial}{\partial x} [a(x, t) p(x, t | x_0, t_0)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [b(x, t)^2 p(x, t | x_0, t_0)]$$

Driftkoeff. $A = a$; Diff. Koeff. $D = \frac{b^2}{2} = \frac{1}{2}$

Beispiel

(i) Wiener-Prozess

$$\dot{x} = \sqrt{2D} \xi(t)$$

Langevin-Gl.

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t | x_0, t_0) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x, t | x_0, t_0)$$

F.P.-Gl.

Lösung der F.P.-Gl. zu Anfangsbed. $p(x, t_0 | x_0, t_0) = \delta(x - x_0)$

charakt. Fkt. $q(s, t) = \int dx p(x, t | x_0, t_0) e^{isx}$ (Fourier Transform)

erfüllt die Dgl

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -D s^2 q, \text{ da } D \int dx \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} p \right) e^{isx} \stackrel{\text{part. Int.}}{=} D \int dx p \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{isx} \right) = -D s^2 q$$

$$\Rightarrow q(s, t) = \exp[-D s^2 (t - t_0)] q(s, t_0) \quad \text{" } e^{isx_0} \text{ (Auf. bed.)}$$

Fourier-Rücktrafo:

$$p(x, t | x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi 2D(t-t_0)}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4D(t-t_0)}\right]$$

$$\langle x(t) \rangle = x_0$$

$$\langle (\Delta x(t))^2 \rangle = 2D(t-t_0)$$



Autokorr. fkt. (nicht-stationär):

$$\langle X(t_1) X(t_2) \rangle_{x_0, t_0} = \iint dx_1 dx_2 x_1 x_2 p(x_1, t_1, x_2, t_2 | x_0, t_0) \quad t_1 \geq t_2 \geq t_0$$

$$= \iint dx_1 dx_2 x_1 x_2 p(x_1, t_1 | x_2, t_2) p(x_2, t_2 | x_0, t_0) \quad \text{Markov}$$

$$= \iint dx_2 \left[\int dx_1 x_1 p(x_1, t_1 | x_2, t_2) \right] x_2 p(x_2, t_2 | x_0, t_0)$$

$$\langle X(t_1) \rangle_{x_2, t_2} = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t_1-t_2)}} \int dx_1 x_1 e^{-\frac{(x_1-x_2)^2}{4D(t_1-t_2)}}$$

$= x_2$ (Mittelwert bleibt zeitlich konstant)

Grund: Markov

$$= \int dx_2 x_2^2 p(x_2, t_2 | x_0, t_0)$$

$$\begin{aligned}
&= \langle X(t_2) \rangle_{t_0, t_0} \\
&= 2D(t_2 - t_0) + x_0^2 \quad (\text{da Varianz der Gaußvert.}) \\
&\qquad \qquad \qquad \langle \Delta X^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - x_0^2 = \\
&\qquad \qquad \qquad = 2D(t_2 - t_0)
\end{aligned}$$

unabh. von t_1 !

⇒ Wiener Prozess zu verschied. Zeiten statist. unabhängig!

Ohne Anf. bed. x_1, t_0 :

$$\begin{aligned}
\langle X(t_1) X(t_2) \rangle &= \int dx_1 dx_2 x_1 x_2 p(x_1, t_1, x_2, t_2) \\
&= \int dx_2 \underbrace{\left[\int dx_1 x_1 p(x_1, t_1, x_2, t_2) \right]}_{\langle X(t_1) \rangle_{x_2, t_2}} x_2 p(x_2, t_2)
\end{aligned}$$

⇒ Regressionstheorem:

Die Autokorr. fkt. für ein Markovprozess
gehört denselben Beweg. gln. wie die Mittelwerte,
z.B.

$$\frac{d}{dt} \langle X(t) \rangle_{x_0, t_0} = -A \langle X(t) \rangle_{x_0, t_0}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle X(t) X(t_0) \rangle = -A \langle X(t) X(t_0) \rangle$$